

UNIVERZA V LJUBLJANI  
FAKULTETA ZA MATEMATIKO IN FIZIKO  
ODDELEK ZA FIZIKO

VIŠJE RAČUNSKE METODE

**3. naloga: Trotter-Suzukijev razcep: Simplektična integracija**

Žiga Šinigoj, 28222025

Ljubljana, marec 2023

# 1 Izračun

Po navodilu naloge sem obravnaval 2D anharmoni oskilator

$$H = \frac{1}{2}p_1^2 + \frac{1}{2}p_2^2 + \frac{1}{2}q_1^2 + \frac{1}{2}q_2^2 + \lambda q_1^2 q_2^2 . \quad (1)$$

Za simulacijo dinamike je v problemih, kjer se ohranja energija, smiselno uporabiti simplektične metode. Osnovna ideja je razcep Liouvilovega propagatorja

$$U(\cdot, H) = \exp(dt\{\cdot, H\}) , \quad (2)$$

kjer  $dt$  označuje časovni korak. S pomočjo Trotter-Suzuki razcepa in BCS lahko razcepim propagator na različne načine, kateri nam dajo različno natančnost propagacije. Potrebno je poračunati delovanje kinetičnega in potencialnega propagatorja na vektor posplošenih koordinat  $(\underline{q}, \underline{p}) = (q_1, q_2, p_1, p_2) \equiv \mathbf{x}$ .

$$\exp(dt\{\cdot, T\})(\underline{q}, \underline{p}) = (q_1 + p_1 dt, q_2 + p_2 dt, p_1, p_2) \quad (3)$$

$$\exp(dt\{\cdot, V\})(\underline{q}, \underline{p}) = (q_1, q_2, p_1 - dtq_1(1 + 2\lambda q_2^2), p_2 - dtq_2(1 + 2\lambda q_1^2)) , \quad (4)$$

sedaj lahko tvorim simplektične integratorje S4, S3, S2, ki so opisani v navodilu naloge. Rezultate sem primerjal tudi z metodo Runge-Kutta. Pri tem sem uporabil vgrajeno metodo iz SciPy paketa *solve\_ivp*.

## 2 Rezultati

Pri nalogi je bilo potrebno izračunati trajektorije v faznem prostoru za različne  $\lambda$  in preveriti ohranitev energije sistema ob uporabi različnih integratorjev. Trajektorije v faznem prostoru prikazuje slika 1. Pri  $\lambda = 0$  je orbita krožnica v faznem prostoru koordinat  $(q_i, p_i)$ . V prostoru koordinat  $(q_1, q_2)$  oziroma  $(p_1, p_2)$  pa elipsa. Za dani začetni pogoj, fazni prostor prvega prvega oscilatorja približno popišejo krožnice, krivulje v faznem prostoru drugega oscilatorja pa se netrivialno spremenijo, ampak še vedno imam približno periodično gibanje. V prostoru koordinat  $(q_1, q_2)$  oziroma  $(p_1, p_2)$  me, ob vklopu motnje, krivulje faznega prostora spominjajo na Lissajevske krivulje. Pri večanju parametra motnje  $\lambda$  pa se sistem podre in ni več periodičnega gibanja (npr.  $\lambda = 10$ ), krivulje zapolnijo fazni prostor.

Pri ohranjanju energije sistema se je presenetljivo najbolje odrezal simetrični integrator S3, ki ima kompleksne koeficiente. Čeprav ima po teoriji enak red natančnosti kot integrator S4  $\mathcal{O}(dt^5)$  bolje ohranja energijo kot S4. Odstopanja od začetne energije sistema prikazuje slika 2. Kot vidim se energija ne bistveno zmanjšuje s časom. Najmanj natančna je metoda Runge-Kutta, kjer sem prav tako vzel enak časovni korak  $dt = 0.01$ , zato da je smiselna primerjava. Natančnost integratorjev S2, S3, S4 se sklada s teorijo  $\mathcal{O}(dt^2)$ ,  $\mathcal{O}(dt^5)$ ,  $\mathcal{O}(dt^5)$ . Ob vklopu motnje slika 2b) se energija še vedno ohranja do enakega reda kot prej. Pojavi se več nihanj okrog povprečne vrednosti zaradi spremenjenega gibanja oscilatorja. Ker ni velike časovne odvisnosti v odstopanju energije sem pogledal maksimalno odstopanje pri danem parametru motnje  $\lambda$  (slika 2c)). Odstopanje je približno konstantno do vrednosti  $\lambda \approx 0.1$ . Po tej vrednosti se odstopanja večajo pri vseh metodah. Ohranitev energije je tudi odvisna od velikosti časovnega koraka  $dt$ . Pri prevelikih časovnih korakih sistem divergira. Odvisnost od velikosti koraka in parametra  $\lambda$  prikazuje slika 2d) za integrator S4 in slika 3a) za integrator S2.

### 2.1 Veljavnost ekviparticijskega izreka

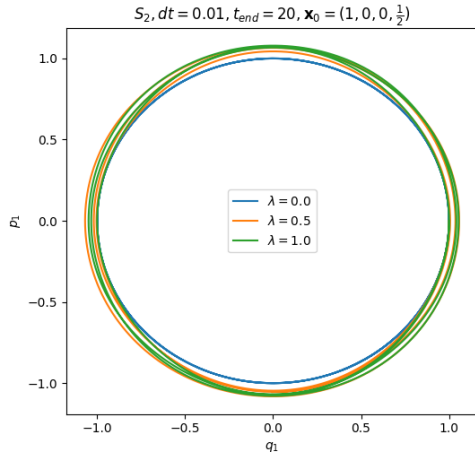
Če velja ekviparticijski izrek, potem mora veljati

$$\lim_{t \rightarrow -\infty} \langle p_1^2 \rangle(t) = \lim_{t \rightarrow -\infty} \langle p_2^2 \rangle(t) , \quad (5)$$

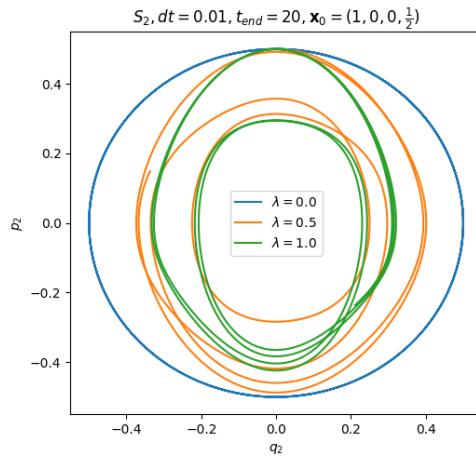
kjer je

$$\langle p_j^2 \rangle(t) = \frac{1}{t} \int_0^t p_j^2(t') dt' . \quad (6)$$

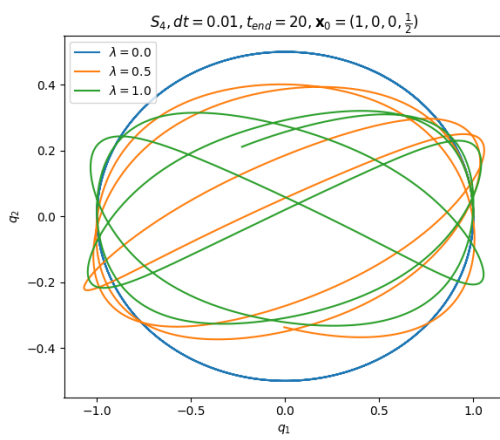
Veljavnost sem preveril tako, da sem pogledal razliko povprečji kvadratov gibalnih količin  $p_1$  in  $p_2$  pri različnih vrednostih  $\lambda$  (slika 3). Ekviparticijski izrek začne veljati pri vrednosti  $\lambda \approx 5$ . Gibanje oscilatorja je z večanjem  $\lambda$  vedno bolj stohastično.



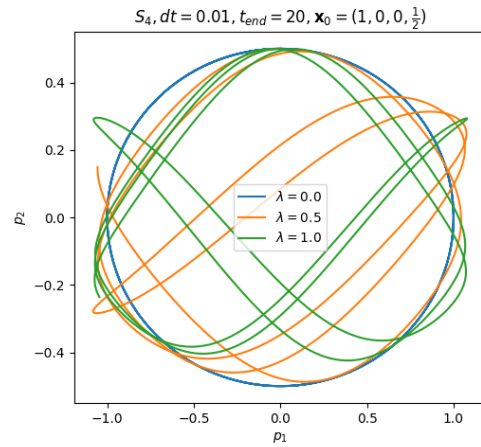
(a)



(b)



(c)

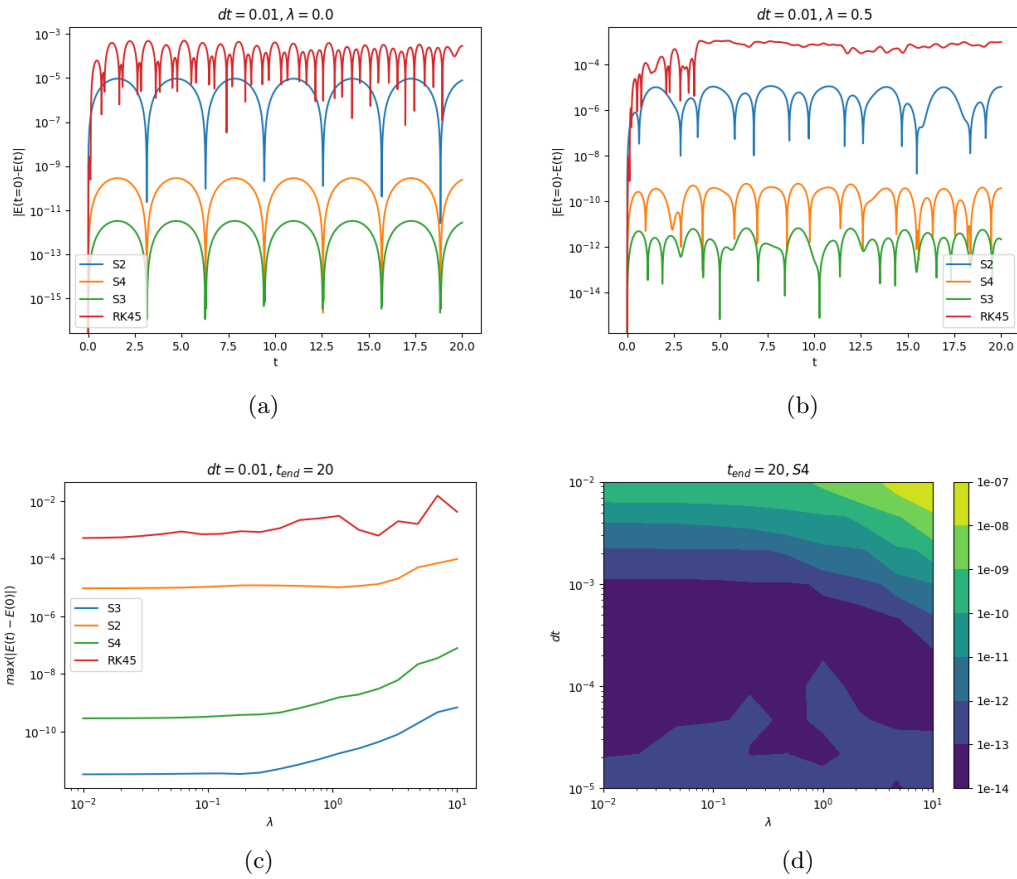


(d)

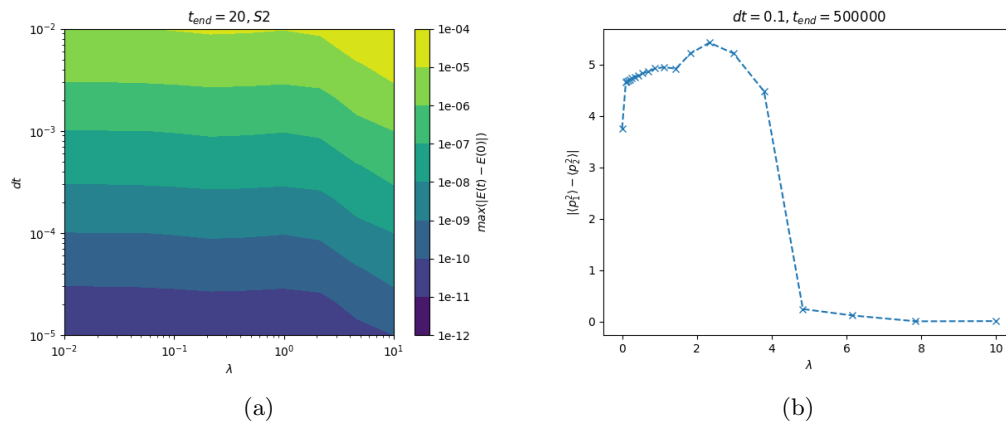
Slika 1:  $\mathbf{x}_0$  označuje začetno stanje,  $t_{end}$  končni čas simulacije. a) Fazni prostor prvega harmonskega oscilatorja. b) Fazni prostor drugega harmonskega oscilatorja. c) Krivulje v faznem prostoru koordinat  $(q_1, q_2)$ . d) Krivulje v faznem prostoru koordinat  $(p_1, p_2)$ .

## 2.2 Zaključek

Suzuki-Trotterjev razcep in uporaba BCS formul nam da 'split-step' formule, ki zelo dobro opišejo sisteme, v katerih se energija ohranja. Natančnost se izboljša za več velikostnih redov od znanih integratorjev Runge-Kutta, Euler,... Splošen zapis simetrične formule višjega reda se relativno preprosto zapisati iz nižjih redov. Za poljubno metodo m-tega reda pa je potrebno za vsak red posebej izpeljati rekurzivne relacije in rešiti nerlinearen sistem enačb, zato splošnega recepta oz. splošnega sistema enačb, ki bi dale koeficiente integratorja nisem našel.



Slika 2: a) Odstopanje energije od začetne energije v odvisnosti od časa pri  $\lambda = 0$ . b) Odstopanje energije od začetne energije v odvisnosti od časa pri  $\lambda = 0.5$ . c) Maksimalno odstopanje energije od začetne energije v odvisnosti od  $\lambda$ . d) Maksimalno odstopanje energije od začetne energije sistema v odvisnosti od velikosti koraka in parametra  $\lambda$ .



Slika 3: a) Maksimalno odstopanje energije od začetne energije sistema v odvisnosti od velikosti koraka in parametra  $\lambda$ . b) Razlika povprečji kvadratov gibalnih količin pri različnih vrednostih  $\lambda$ .